Introduction au logiciel de simulation ASPEN-Plus

J. Schwartzentruber

Septembre 2005

Ce document se veut une rapide introduction au logiciel ASPEN-Plus, qui sera utilisé pour les travaux dirigés du cours de modélisation des procédés.

Ce logiciel a initialement été développé au MIT dans le cadre d'une recherche menée sous l'égide du Department Of Energy Américain (entre 1975 et 1980). Le programme ASPEN (pour Advanced System for Process Engineering) qui en est résulté est du domaine public. Le projet a ensuite été repris par la société ASPEN-Technology (qui regroupe nombre d'anciens chercheurs et enseignants du MIT), qui développe et commercialise le logiciel ASPEN-Plus depuis 1981.

Les principales caractéristiques d'ASPEN Plus sont :

- grand ensemble d'opérations unitaires
- nombreux modèles de calcul des propriétés physiques
- systèmes de régression de données et de génération de tables de propriétés physiques
- méthodes de contributions de groupes permettant de suppléer au manque de données expérimentales pour l'estimation des propriétés physiques
- caractérisation des fractions pétrolières
- système intégré de traitement des électrolytes
- capacité à traiter les solides
- possibilité d'inclure des modèles de l'utilisateur (de propriétés physiques et d'opérations unitaires)
- séquencement et convergence automatique des schémas de procédé (ASPEN est bâti sur l'architecture séquentielle-modulaire)
- possibilité de définir des spécifications de design
- possibilité d'optimisation paramétrique
- choix entre plusieurs algorithmes de convergence pour les recyclages, les spécifications de design et l'optimisation
- évaluation des coûts et de la rentabilité (ce qui inclut des calculs de dimensionnement des appareils)
- interface graphique assez simple d'emploi

ASPEN-Plus peut être utilisé pour modéliser des procédés de :

- chimie organique et minérale, de la grande synthèse à la chimie fine
- pétrochimie
- liquéfaction du charbon
- gazéification du charbon
- traitement des roches bitumineuses
- pulpes et papiers
- agro-alimentaire
- traitement des minéraux
- biotechnologie

1 Les principales caractéristiques d'Aspen

1.1 Opérations unitaires et courants

Aspen est construit autour d'une architecture séquentielle-modulaire. Une opération unitaire est représentée par un sous-programme auquel on fournit les variables des débits d'entrée et les paramètres de fonctionnement, et qui renvoie les variables des débits de sortie.

Un débit est représenté par un vecteur contenant :

- les débits partiels de chaque constituant
- la pression, la température
- l'enthalpie massique, la fraction de vapeur, celle de liquide l'entropie massique, et la densité

Il est possible de décomposer un débit en sous-débits, ayant chacun cette structure générale. Les sous-débits peuvent être du type MIXED (mélange de liquide, vapeur et solide), CISOLID (solide conventionnel inerte vis à vis des équilibres entre phases) ou NC (solide non- conventionnel, c'est à dire auquel on ne peut pas attribuer de formule chimique précise. [1]

1.2 Le calcul des recyclages

Dans une approche séquentielle-modulaire, les recyclages sont convergés itérativement : on définit un courant "coupé", et on établit un processus de convergence sur les variables de ce courant coupé, en calculant de façon itérative les opérations de la boucle de recyclage.

A partir d'une description de la structure du procédé (schéma de connexion des opérations unitaires) le logiciel détermine automatiquement les boucles de recyclage, choisit les courants à couper pour permettre la convergence, et détermine la séquence de calcul des opérations unitaires.

Il est néanmoins possible pour l'utilisateur de choisir d'autres courants coupés que ceux proposés par le logiciel, ce qui est très utile lorsque l'on sait en initialiser les valeurs.

1.3 Le système de propriétés physiques

Les propriétés physiques (thermodynamiques et propriétés de transport) sont nécessaires au cours d'une simulation pour le calcul des opérations unitaires (équilibres liquide-vapeur et enthalpies), et pour le dimensionnement (viscosité, conductivité thermique, ...)

[1] C'est par exemple le cas du charbon, qui sera représenté par différentes analyses : teneur en humidité, carbone fixe,composés volatils, soufre, en cendres, ...

Un système de calcul de ces propriétés physiques donne ces propriétés comme fonctions des variables d'état (température, pression, composition), à partir de modèles d'origine empirique ou moléculaire, en utilisant des paramètres stockés dans des banques de données (coordonnées critiques, paramètres de corrélation (Antoine), ...). ASPEN fournit un grand nombre de "méthodes" de calculs pour ces propriétés physiques, collections de routines de calcul des propriétés physiques qui sont directement utilisées par les modèles d'opérations unitaires.

Le choix raisonné des modèles et corrélations adaptées au calcul des propriétés thermodynamiques et de transport pour un type de mélange donné est souvent un domaine de spécialiste.

2 Un exemple de procédé

Pour introduire à l'utilisation du logiciel, nous traiterons un schéma de procédé simple, la production de cyclohexane par hydrogénation du benzène.

Le cyclohexane est un important intermédiaire pour la fabrication de fibres synthétiques (nylon), qui peut être produit par addition d'hydrogène sur le benzène.

Le schéma de procédé est représenté en figure 1. Le benzène et l'hydrogène sont mélangés à de l'hydrogène et du cyclohexane recyclés pour alimenter un réacteur catalytique à lit fixe.

La réaction a lieu en phase vapeur et s'écrit :

$$C_6H_6 + 3H_2 \rightarrow C_6H_{12}$$

Le benzène introduit est converti à 99.8%. La chaleur de réaction pour cette réaction hautement exothermique est évacuée par de l'eau à l'état d'ébullition. L'effluent du réacteur est ensuite refroidi et séparé en deux phases liquide et vapeur. La phase liquide est introduite dans une colonne de distillation afin d'éliminer les gaz légers dissous et de stabiliser le produit. Une partie du liquide du séparateur est recyclée au réacteur pour aider le contrôle de température.

La vapeur sortant du séparateur, essentiellement formée d'hydrogène est recyclée vers le réacteur. Une fraction de cette vapeur est purgée, pour évacuer les inertes qui "tournent" dans le procédé.

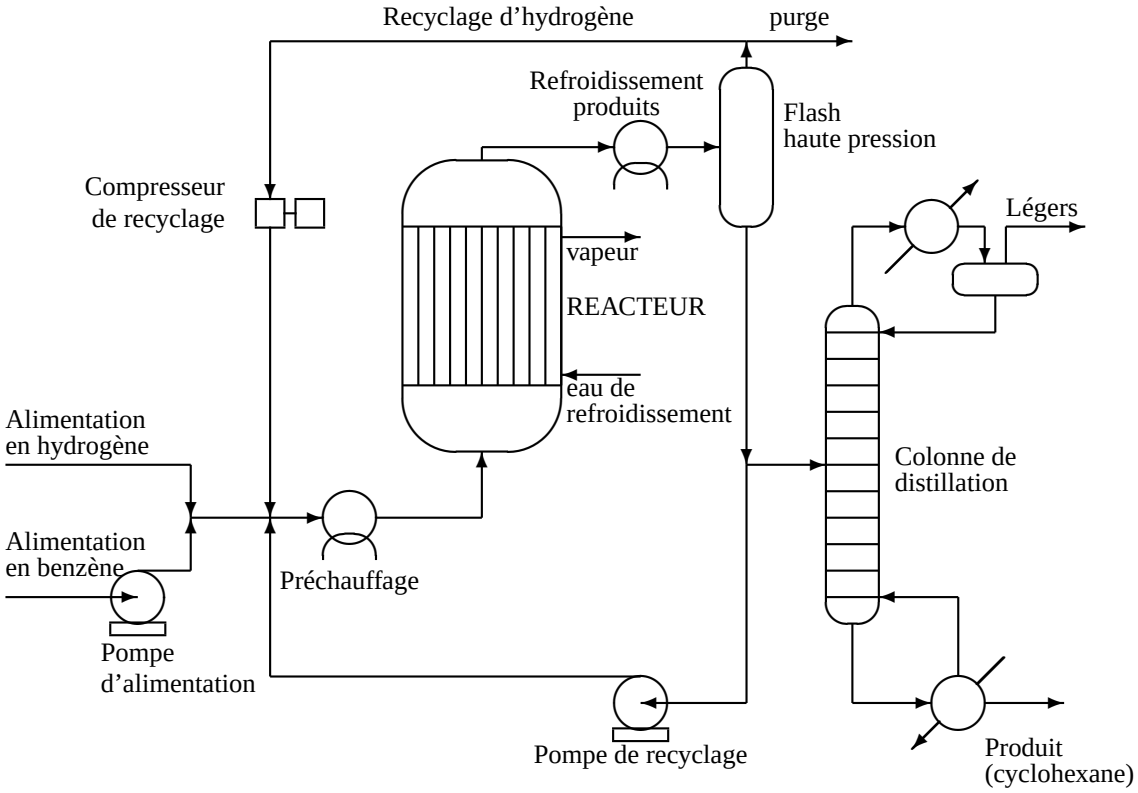
On cherche à développer un modèle de simulation pour ce procédé et à déterminer tous les produits, les débits de matière intermédiaires et la performance de chaque unité du procédé.

Les conditions opératoires du procédé sont décrites ci-dessous.

Alimentations		
Composition (% molaire)	benzène	hydrogène
hydrogène	0.0	97.5
azote	0.0	0.5
méthane	0.0	2.0
benzène	100.0	0.0
Débits molaires (kmol/h)	50	env. 150
Température (K)	310	310
Pression (atm)	1	23
Pompe d'alimentation	centrifuge pression de sortie=23 atm	
Préchauffeur	température de sortie 422 K perte de charge 1 atm	
Réacteur	99.8% du benzène convertis température de sortie 475 K perte de charge 1 atm.	
Refroidissement des produits	température de sortie 320K perte de charge 0.3 atm	
Séparateur haute pression	pas de perte de charge température = 322 K	
Purge	8% de la vapeur du séparateur	
Compresseur de recyclage	alternatif pression de sortie = 23 atm	
recyclage du cyclohexane	30% du liquide du séparateur	
Pompe de recyclage	centrifuge pression de sortie= 23 atm	
Colonne de distillation		
Nb d'étages théoriques (y compris condenseur et rebouilleur)	15	
Taux de reflux	1.2	
Position de l'alimentation	8e étage (à partir du haut)	
Pression	13.5 atm	
Taux de récupération du cyclohexane dans le résidu	99.99%	
Condenseur	partiel	
Etat du distillat	vapeur	

On s'impose de plus une **spécification de design** : le rapport H_2/C_6H_6 dans le réacteur doit être égal à 3.3. On ajustera le débit d'alimentation en hydrogène

FIG. 1 – Hydrogénation du benzène en cyclohexane : schéma de procédé



pour respecter cette spécification.

Pour simplifier la modélisation, il est possible de regrouper les opérations unitaires en ensembles fonctionnels (cf figure 2). On obtient alors le diagramme de blocs de la figure 3. Il est clair que cette description du problème ne permettra pas d'accéder individuellement à la puissance requise par chaque compresseur, par exemple : en fait, on centre ici son intérêt sur les transformations globales de la matière. De la même façon, on ne cherche qu'à écrire un bilan énergétique global sur le réacteur (en particulier, de déterminer la quantité de chaleur à évacuer), sans faire le dimensionnement de l'échangeur de chaleur qui devra être utilisé à cette fin.

3 Modélisation du procédé avec Aspen

3.1 Construction du schéma de procédé

A partir du menu Demarrer de Windows, choisir : Programmes /Aspen Tech /Aspen Engineering Suite / Aspen Plus 11.1 / Aspen Plus User Interface (il est

FIG. 2 – Hydrogénation du benzène : ensembles fonctionnels dans le schéma de procédé

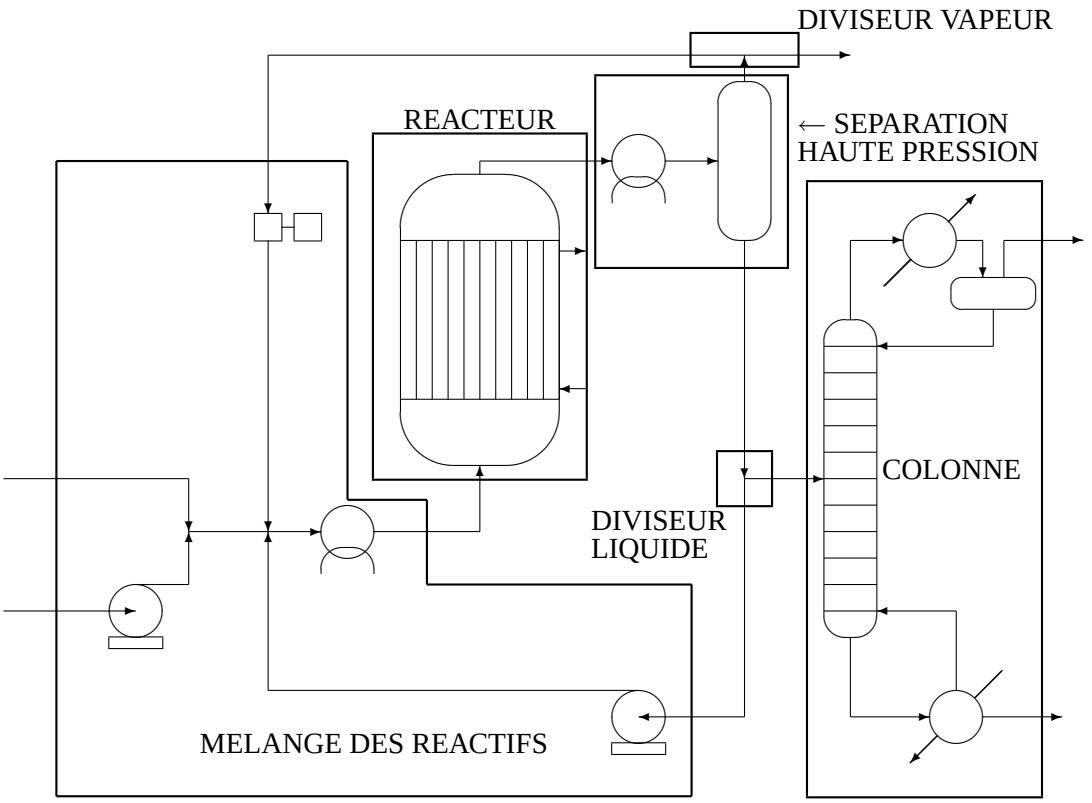


FIG. 3 – Hydrogénation du benzène : diagramme de blocs

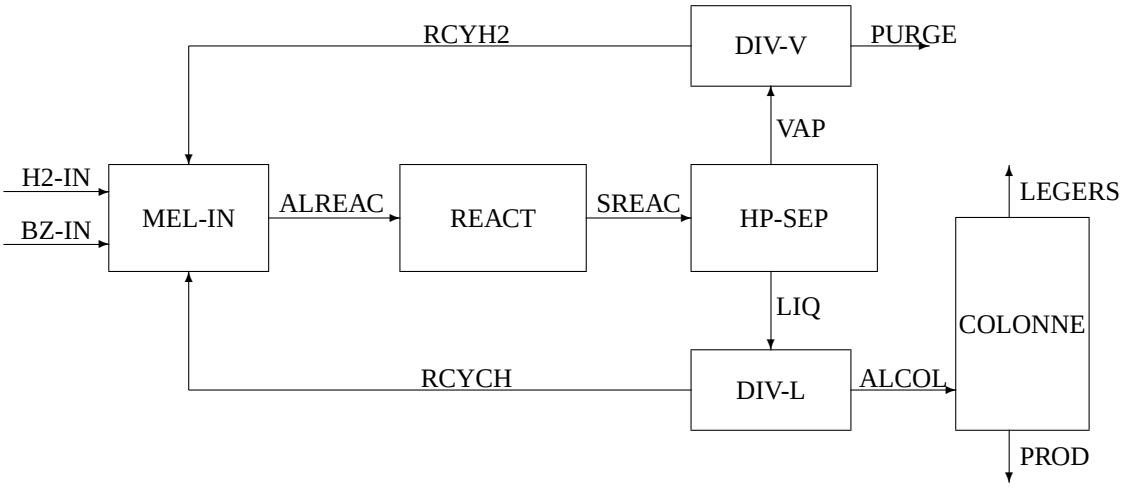
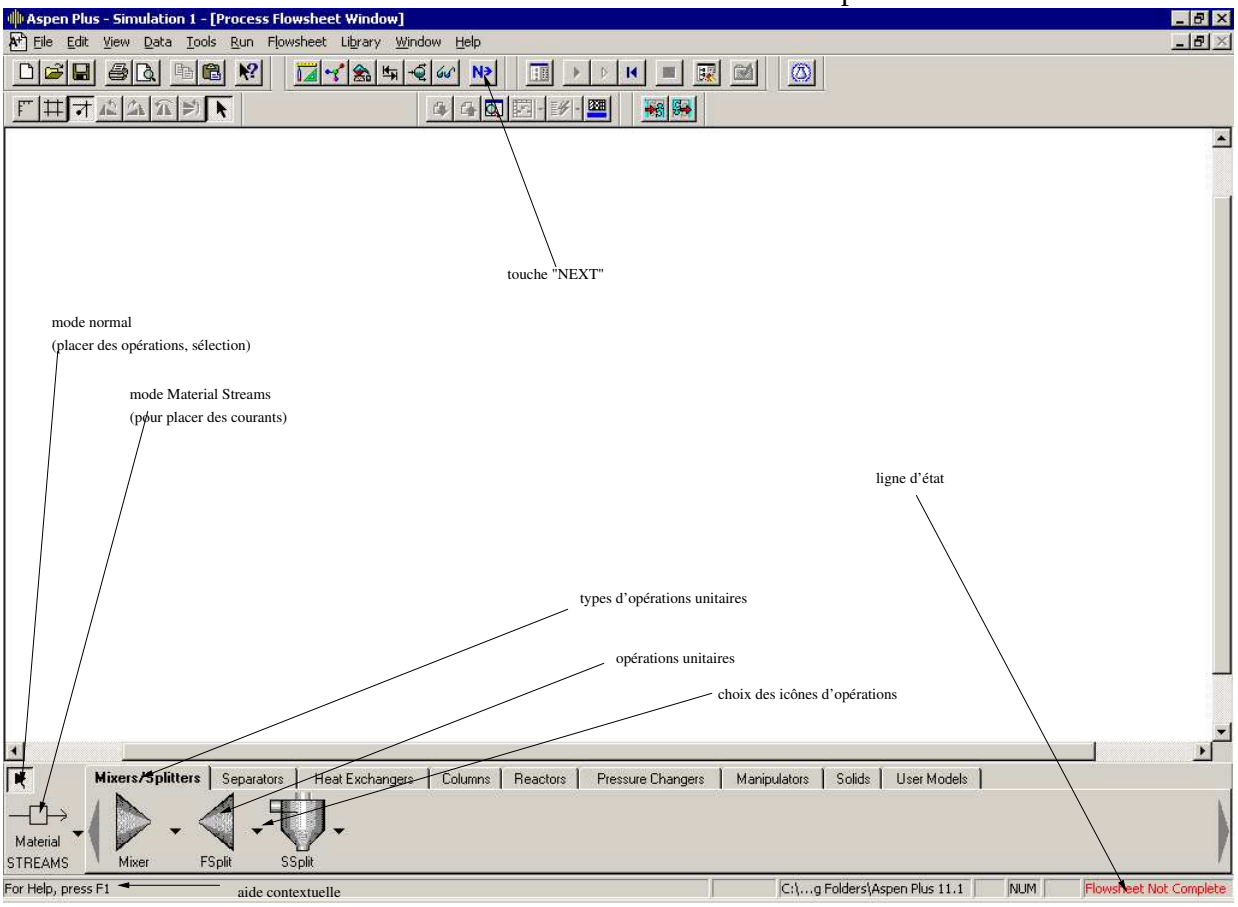


FIG. 4 – Les éléments de la fenêtre Aspen



conseillé de placer un raccourci sur le bureau !)

Choisir "Blank Simulation". La figure (4) montre la fenêtre qui s'ouvre alors.

La première opération consiste à définir le schéma de procédé (nature et connexions des opérations unitaires).

On place les opérations unitaires en choisissant d'abord leur type (colonne, réacteur...) dans les onglets du bas de page, puis en sélectionnant l'opération souhaitée. On peut aussi sélectionner l'icône la plus appropriée (le choix de l'icône n'a pas d'incidence sur le calcul).

On place ensuite l'opération unitaire dans la zone de travail (bouton gauche).

Pour placer un débit de matière, on commence par sélectionner le mode "Material Streams" (en bas à gauche).

Dès que l'on amène le curseur dans la zone de dessin, les connexions possibles des opérations unitaires apparaissent : flèches rouges pour les connexions obligatoires, bleues pour les connexions optionnelles. Il suffit de cliquer sur un port de

sortie d'une opération, puis sur un port d'entrée d'une autre opération, pour créer le débit reliant les deux opérations.

Pour créer un courant d'alimentation, on amène un débit d'une zone vide de l'écran vers un port d'entrée d'une opération. Un courant de sortie part d'un port de sortie d'une opération et se termine en un point vide de la fenêtre (extérieur du procédé).

Pour sortir du mode "Material Streams", cliquer sur la flèche oblique en bas à gauche, juste au-dessus de l'icône "Material Streams".

Selon les options en cours (voir dans le menu déroulant "**Tools/options/flowsheet**") les opérations et les débits placés se verront affecter automatiquement un nom, ou ce nom sera systématiquement demandé à l'utilisateur.

On sélectionne une opération ou un débit en cliquant dessus avec le bouton gauche. On peut alors faire apparaître un menu avec le bouton droit, qui permet soit de décrire l'opération ou le débit ("input"), de les supprimer, de changer l'icône, de renommer, de déconnecter ou reconnecter un débit, etc...

On déplace une opération en restant cliqué dessus avec bouton gauche jusqu'à faire apparaître une croix de positionnement. On peut ensuite la déplacer en glissant la souris (bouton toujours enfoncé).

Chaque opération a des ports d'entrée/sortie qui doivent impérativement être connectés (ils sont indiqués "req", pour "required"). Lorsque toutes les connexions indispensables sont faites, le message d'état passe de "Flowsheet not Complete" à "Required Input not complete" : cela signifie qu'il faut maintenant décrire les débits d'alimentation, les réglages d'opérations, etc...

On obtient ainsi le schéma de la figure (5).

3.2 Les formulaires

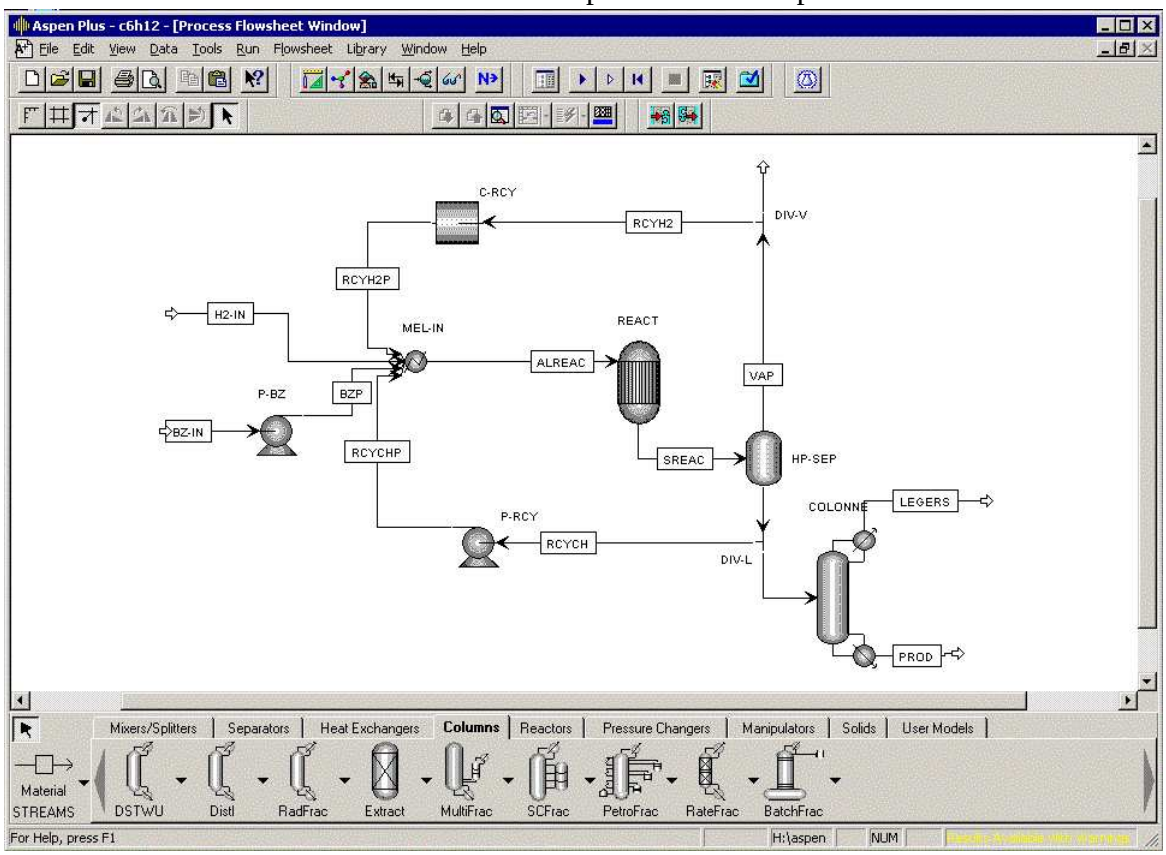
Une fois le schéma de procédé complet, l'utilisateur doit indiquer :

- les constituants en présence
- les modèles et paramètres de calcul des propriétés physiques (propriétés thermodynamiques et propriétés de transport)
- la composition et les conditions des débits d'entrées
- les réglages des opérations unitaires
- le cas échéant, définir le type de calcul à faire (conditions particulières, recherche d'objectif, optimisation)

Le plus simple pour construire un cas de base permettant la simulation du procédé est de se laisser guider par la touche "NEXT"(un N avec une flèche vers la droite), dans la barre d'outils. [2] Toutes les questions nécessaires pour construire une simulation cohérente seront posées par le logiciel.

[2] il faut que la barre d'outils "Data Browser" soit sélectionnée dans View/Toolbar

FIG. 5 – Schéma de procédé dans Aspen



On renseigne la simulation en remplissant des formulaires (“forms”). Un formulaire est constitué de champs à renseigner. Certains champs ne peuvent avoir que des contenus prédéterminés, que l’on peut alors sélectionner dans une liste déroulante (marquée par une flèche vers le bas).

Chaque formulaire est formé de plusieurs onglets. Les onglets qui exigent d’être complétés sont marqués par un cercle rouge ; une fois complétés, ils sont cochés en bleu.

3.2.1 Formulaire “Setup”

Le premier formulaire intitulé “setup” permet essentiellement de donner un titre à la simulation, mais permet aussi de choisir les systèmes d’unités : il est fortement conseillé de choisir SI ou Metric plutôt que le système anglais (ENG) qui est sélectionné par défaut !

3.2.2 Les constituants

Le formulaire “Components Specifications” permet de définir les constituants intervenant dans le problème.

Il faut fournir pour chaque molécule un “Comp ID”, qui est un nom (souvent abrégé) choisi par l’utilisateur et l’associer à la formule brute ou au nom officiel du constituant qui permet de le retrouver dans les bases de données du logiciel. Lire l’aide en ligne pour savoir comment retrouver les noms officiels dans les bases de données (figure 6)

3.2.3 Les modèles de propriétés physiques

Le formulaire suivant demande de choisir les modèles de propriétés physiques (thermodynamiques et propriétés de transport). Une "méthode" est un ensemble de corrélations permettant de calculer toutes les propriétés requises de la matière considérée en fonction de la composition, la température et la pression.

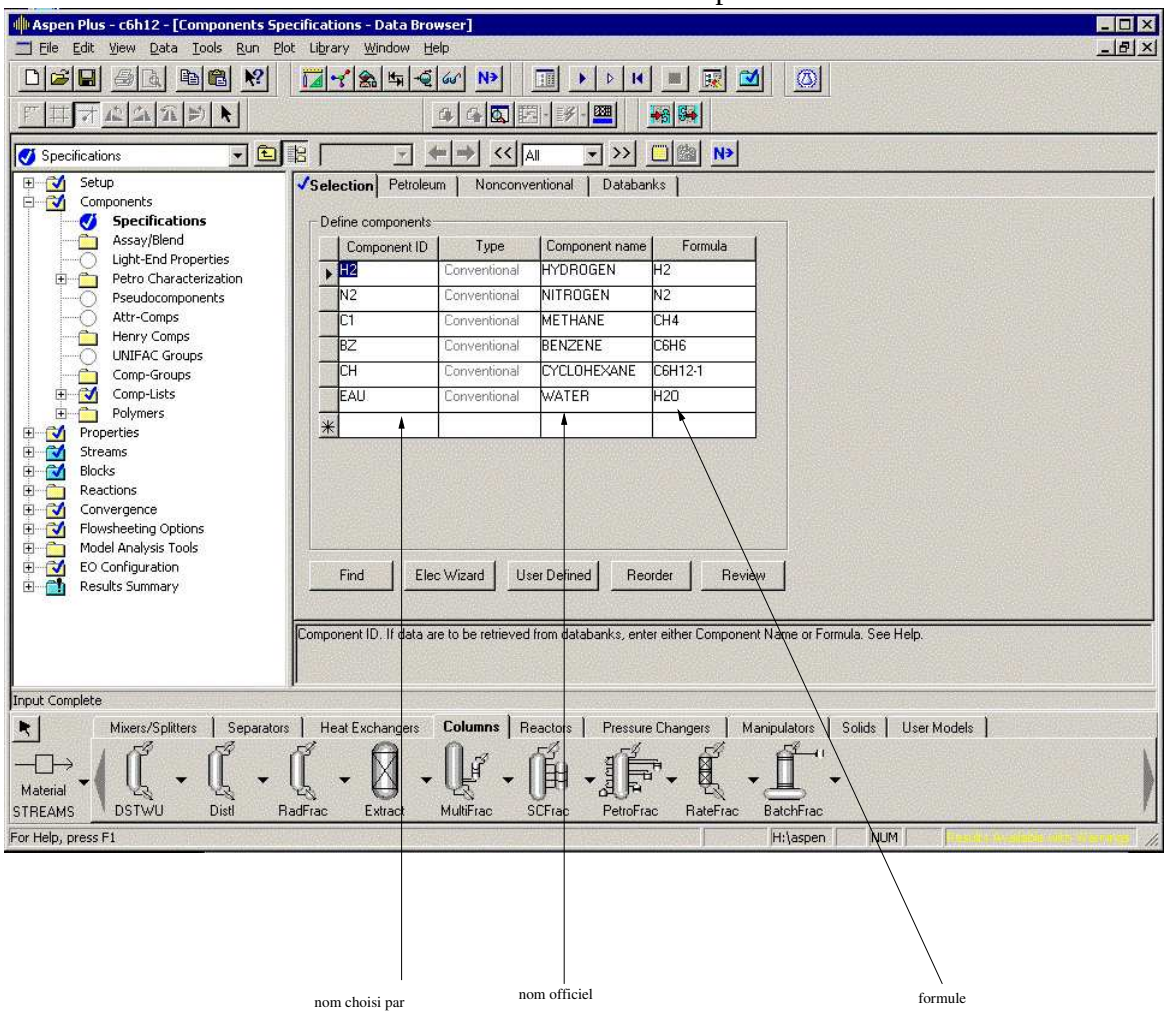
Il suffit en général de compléter le champ “Base method”. Le mieux est de choisir cette méthode de base dans la liste déroulante (commentée dans la zone d’aide contextuelle du formulaire). L’aide en ligne sur les modèles (accessible par F1) est très bien faite.

Ici, nous choisissons l’équation d’état de Soave (RK-SOAVE). (figure 7)

Un modèle thermodynamique demande des paramètres de corps purs et des paramètres binaires.

Les paramètres de corps purs sont normalement cherchés dans les bases de données du système. Les paramètres manquants peuvent être estimés par contributions de groupes, à partir de la formule développée des molécules. (menu ‘**"Pro-**

FIG. 6 – Le formulaire “Components”

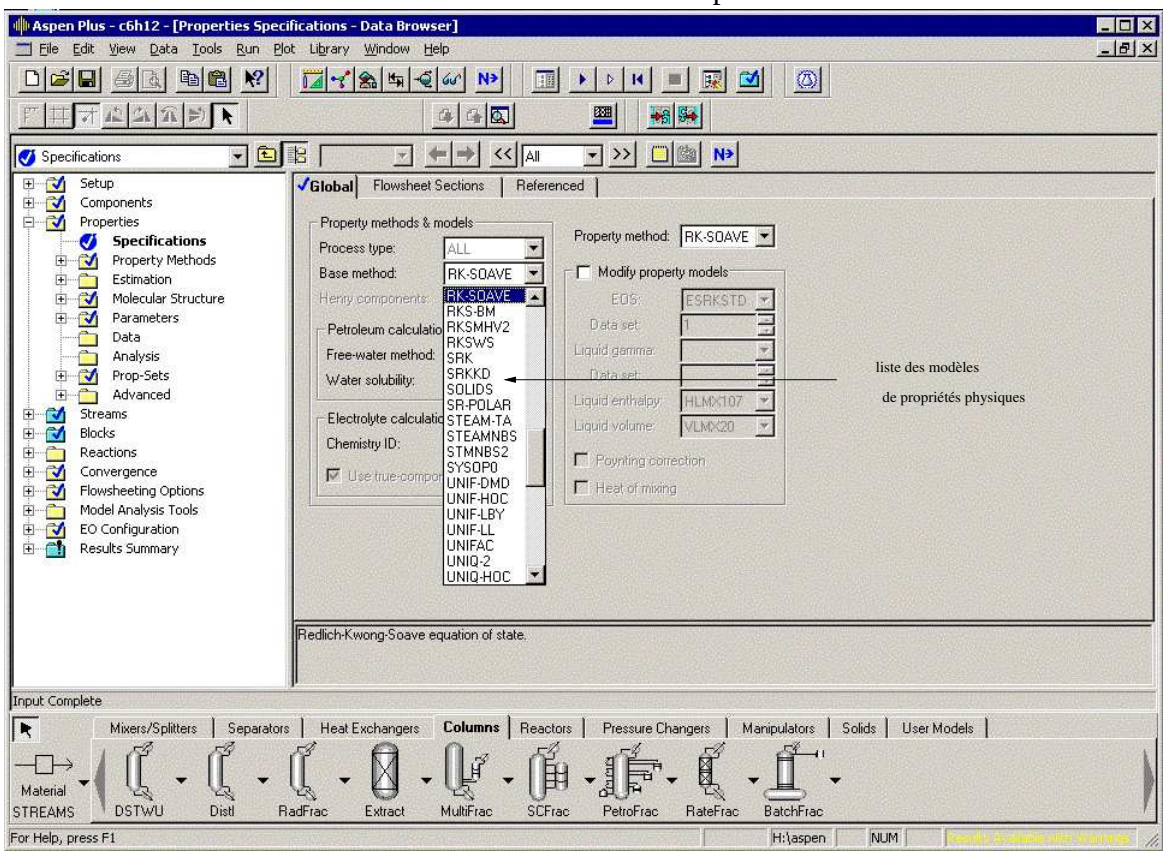


nom choisi par l’utilisateur

nom officiel (dans les bases de données)

formule

FIG. 7 – Le formulaire “Properties”



perties / Estimation"). Il est même possible de créer des molécules n'existant as en base de données en entrant leur formule développée ("**Properties / Molecular-Structure**", et leurs propriétés seront estimées par contributions de groupes.

Un certain nombre de paramètres binaires de modèles sont introduits dans les bases de données, et seront utilisés par défaut. Les paramètres non disponibles seront en général mis à des valeurs par défaut (0). L'utilisateur a bien sûr intérêt à introduire des valeurs déterminées par ajustement de données expérimentales, ou à préférer, pour un première approche, des modèles de représentation des mélanges par contributions de groupes (type UNIFAC).

3.2.4 Définir les débits d'alimentation

Un débit est caractérisé par :

- sa composition : on peut fournir la composition en termes de fractions massiques, molaires ou volumiques, et indiquer le débit total (massique, molaire ou volumique). On peut aussi indiquer les débits partiels de chaque constituant (dans ce cas, le débit total sera calculé par le logiciel).
- son état : on doit fournir deux grandeurs parmi T, P, et fraction vaporisée. A noter qu'une fraction vaporisée de 0 stipule un liquide bouillant.

Il est toujours possible d'indiquer, pour une grandeur, une unité différente du système choisi par défaut (par exemple les pressions en atm au lieu de N/SQM). La figure 8 montre comment est défini le débit d'alimentation en hydrogène.

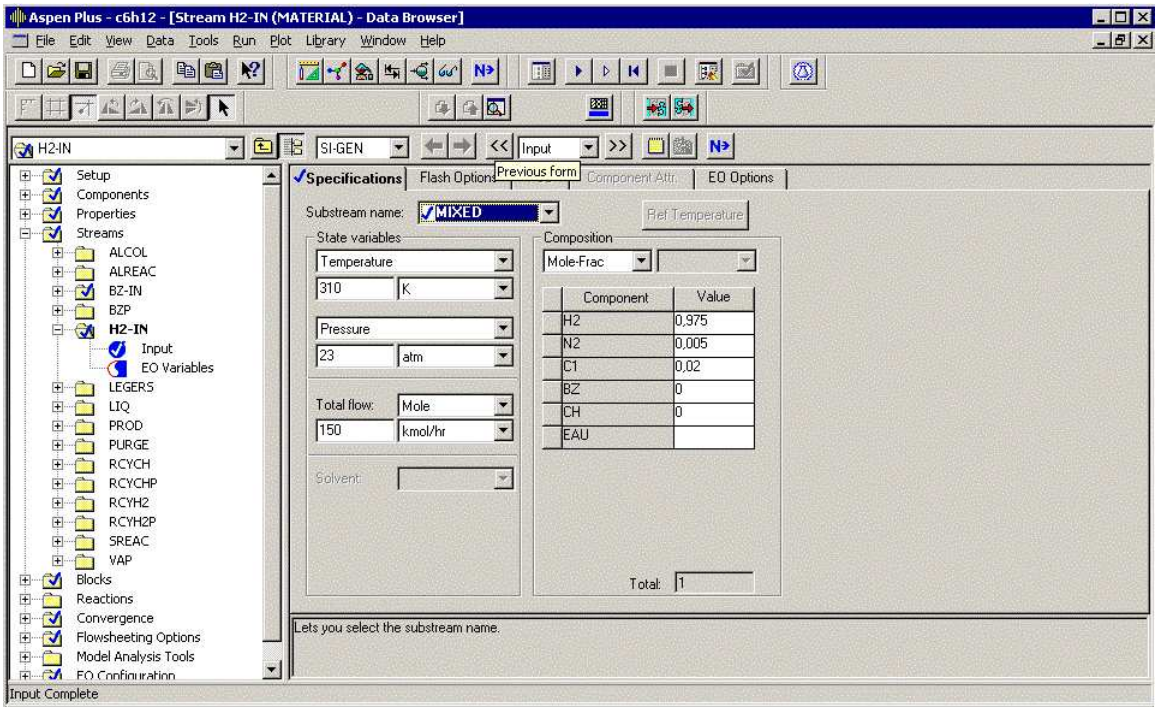
Seuls les débits d'alimentation seront demandés par le logiciel. Il est néanmoins possible d'initialiser les valeurs de débits internes : cela n'a d'intérêt que lorsqu'il s'agit d'un débit coupé dans une boucle de recyclage. Pour initialiser un débit, on peut le sélectionner dans le procédé, et choisir "Input" dans le menu contextuel (bouton droit).

Attention : si vous commencez à remplir une formulaire de débit, il faut absolument le remplir intégralement, même si c'est un débit interne qui sera de toute façon recalculé par le logiciel. On peut détruire un formulaire "Stream" à partir du browser (la liste des formulaires qui apparaît à gauche de toute fenêtre de formulaire).

3.2.5 Les opérations unitaires

Il reste à spécifier les réglages de chaque opération unitaire. Le type de renseignements à fournir dépend bien sûr de la nature de l'opération. Nous donnons par exemple le formulaire correspondant au séparateur haute pression (HP-SEP) en figure 9. On remarque qu'on spécifie une pression nulle : en fait, dans Aspen,*une pression négative ou nulle est interprétée comme une perte de charge* entre l'entrée et la sortie de l'opération.

FIG. 8 – Définir un débit



La figure 10 montre la définition du réacteur, et en particulier la façon dont est introduite la stoechiométrie de réaction.

3.2.6 Introduire une spécification de design

Une fois toutes les opérations unitaires décrites, la simulation du procédé est possible. Le logiciel propose donc de faire la simulation, mais nous souhaitons encore spécifier la condition sur le rapport H_2/C_6H_6 à l'entrée du réacteur.

On sélectionne "**Data / Flowsheeting-Options / Design-Spec**", on appuie sur "New" et on donne un nom à la spécification de design (ou on accepte celui proposé).

Il faut d'abord pouvoir écrire la condition. Pour cela, on associe des noms de variables à des grandeurs du procédé (onglet "define"). On décide par exemple d'appeler DEBH2 le débit d'hydrogène dans ALREAC, DEBBZ celui de benzène (figure 11, premier formulaire).

On écrit ensuite la condition (les expressions sont conformes à la syntaxe du FORTRAN), on indique la variable à manipuler (la logique est en tout point identique à celle de l'onglet "define"), et entre quelles bornes (fig 11, deuxième formulaire). Les unités des bornes ne sont pa explicites, mais c'est l'unité par défaut du système d'unités courant.

FIG. 9 – Définition d'un flash liquide-vapeur

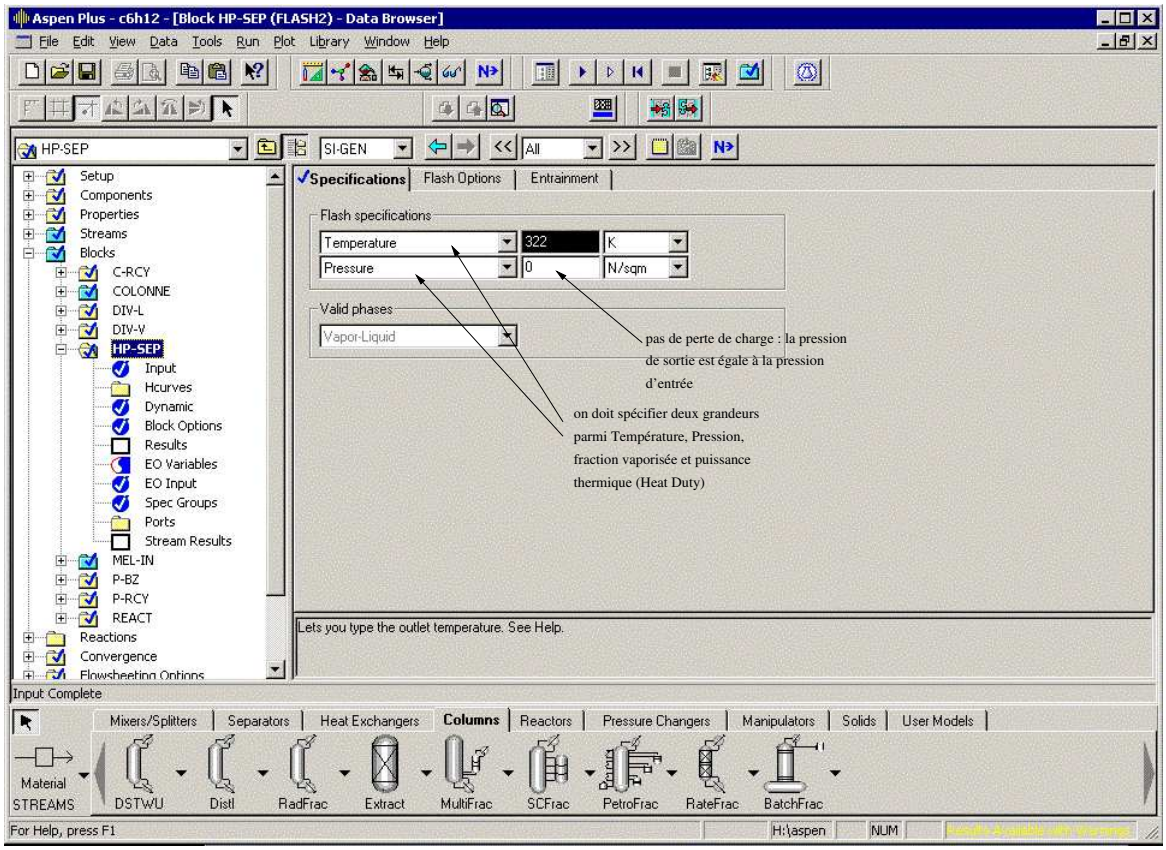
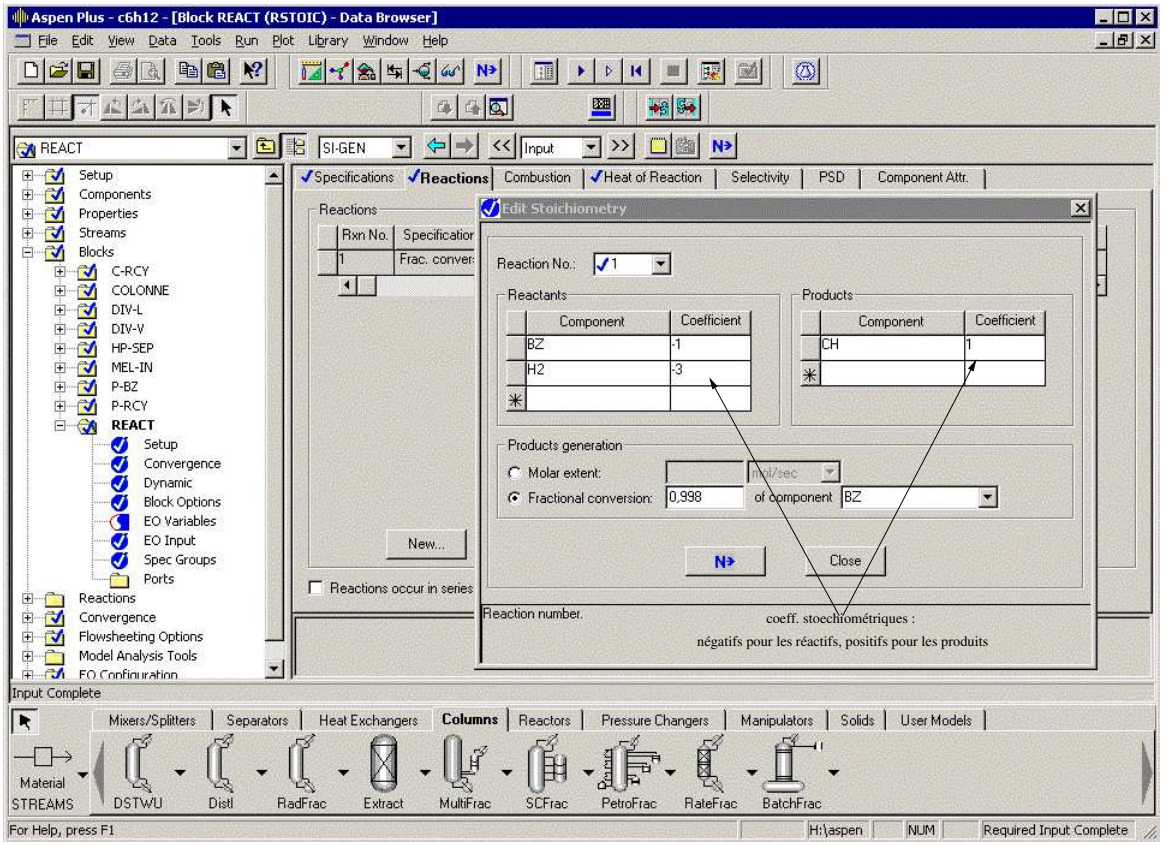


FIG. 10 – Définition d'un réacteur stoechiométrique



La variable à manipuler doit avoir été définie dans la simulation de base (cette valeur sera la valeur d'initialisation du processus itératif).

Il suffit ensuite d'exécuter le calcul du procédé (en appuyant sur NEXT puis OK, ou en ouvrant le panneau de contrôle (menu "**Run / Control Panel**"). Un "panneau de contrôle" permet de suivre l'évolution des calculs. Il est possible d'arrêter les calculs ("Stop"), de les faire opération par opération ("Step") et de visualiser les résultats à chaque étape (fig. 12)

Il suffit en fin de calcul de demander l'affichage des résultats (bouton Results du panneau de contrôle) pour avoir accès à l'ensemble des variables calculées (description complète des débits, des opérations unitaires (figure 13). On peut aussi accéder directement aux résultats concernant une opération unitaire ou un débit en le sélectionnant dans le schéma et en choisissant "Results" dans le menu contextuel (bouton droit).

4 Les principales opérations unitaires

4.1 Alimentations, produits

Ce ne sont pas à proprement parler des opérations unitaires, mais les connexions avec l'extérieur du procédé sont classées dans la rubrique "Feed-Prod" des modèles d'opérations. Il faut simplement faire attention au choix de l'icône, qui permet de distinguer entre des débits matériels (cas le plus fréquent) et des débits de chaleur ou de travail.

4.2 Mélangeurs, diviseurs de débit

4.2.1 Mélangeurs (MIXER)

Un mélangeur (Mixer) accepte un nombre illimité de débits d'entrée et les combine en un débit de sortie unique. L'état du mélange est obtenu à partir d'un calcul d'équilibre isenthalpique (le mélangeur est supposé adiabatique).

La pression de sortie du mélange est, par défaut, la plus petite des pressions des débits d'entrée. On peut indiquer une perte de charge par rapport à cette pression sous la forme d'une pression négative ou nulle.

4.2.2 Diviseurs de débits (FSPLIT)

Un diviseur de débit a un débit d'entrée et un nombre illimité de débits de sortie, tous de même température, pression et composition. On doit préciser, pour chaque débit de sortie sauf un, soit son débit total (molaire ou massique), ou, ce qui est souvent plus pratique, sa fraction par rapport au débit d'entrée.

FIG. 11 – Spécification de design

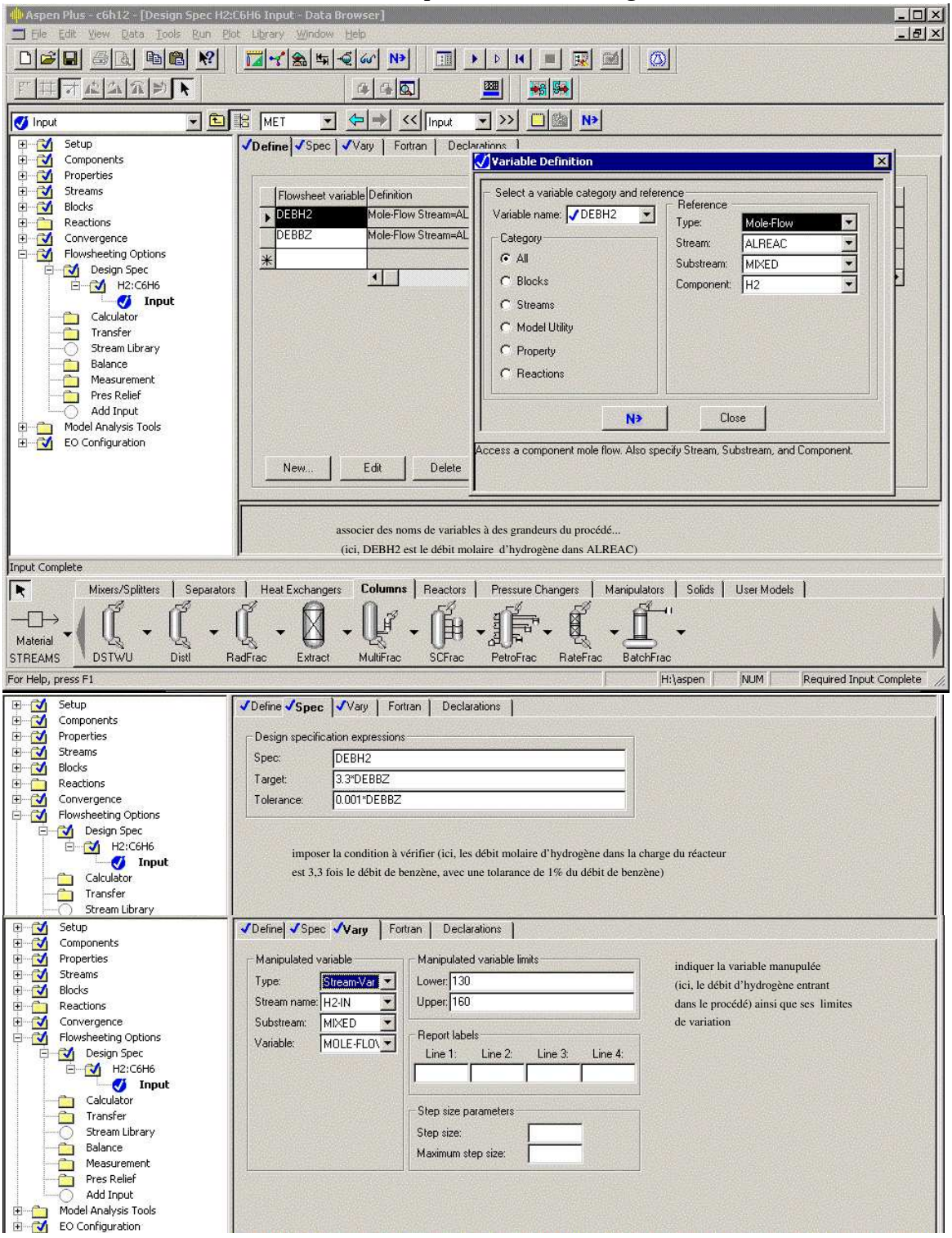


FIG. 12 – Le panneau de contrôle en cours d'exécution

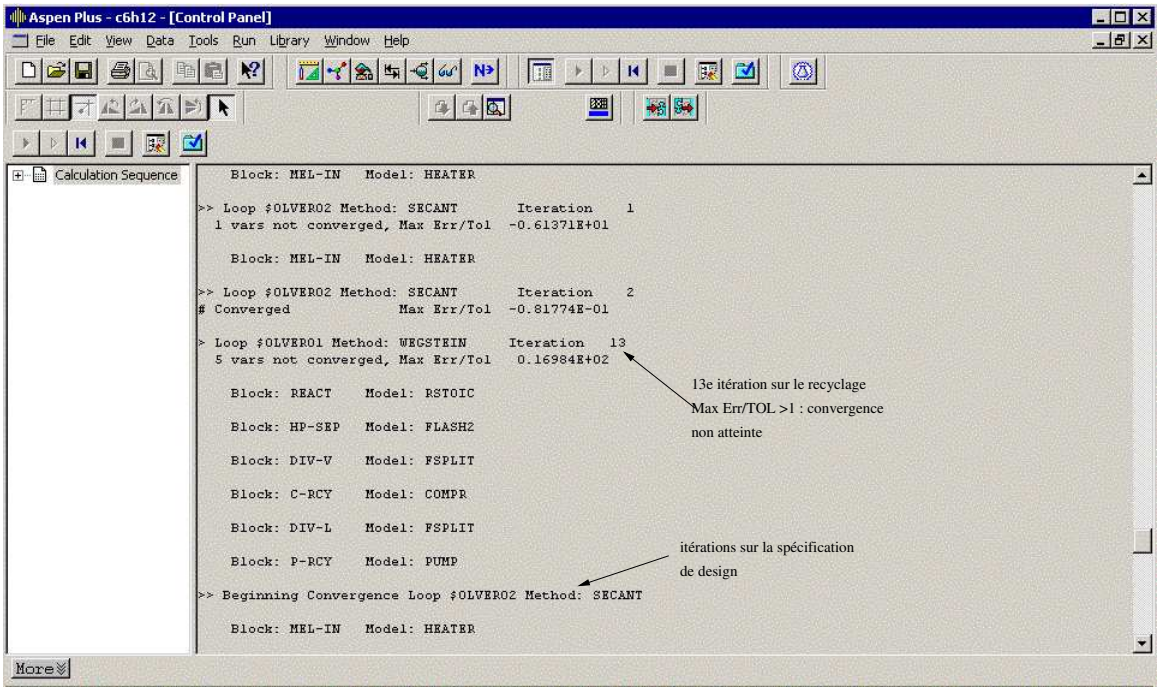
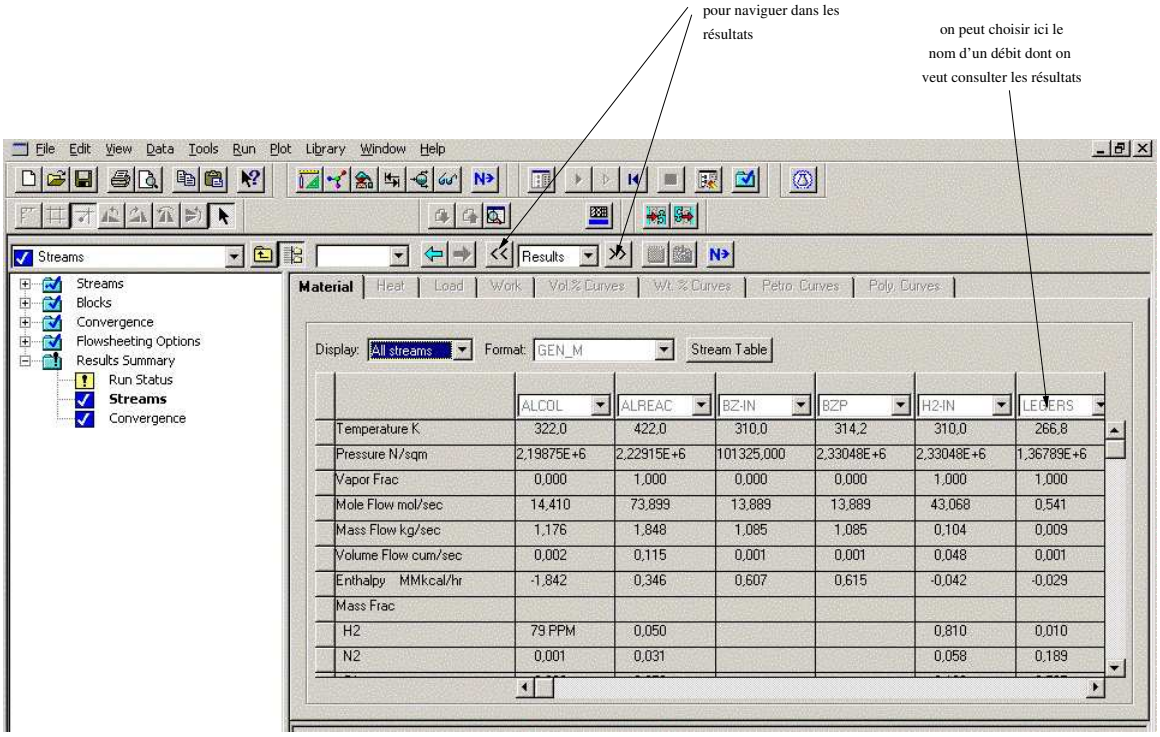

Aspen Plus - c6h12 - [Control Panel]
File Edit View Data Tools Run Library Window Help
Calculation Sequence
Block: MEL-IN Model: HEATER
>> Loop $OLVER02 Method: SECANT Iteration 1
1 vars not converged, Max Err/Tol -0.61371E+01
Block: MEL-IN Model: HEATER
>> Loop $OLVER02 Method: SECANT Iteration 2
Converged Max Err/Tol -0.81774E-01
> Loop $OLVER01 Method: WEGSTEIN Iteration 13
5 vars not converged, Max Err/Tol 0.16984E+02
13e itération sur le recyclage
Max Err/TOL >1 : convergence
non atteinte
Block: REACT Model: RSTOIC
Block: HP-SEP Model: FLASH2
Block: DIV-V Model: FSPLIT
Block: C-RCY Model: COMPR
Block: DIV-L Model: FSPLIT
Block: P-RCY Model: PUMP
itérations sur la spécification
de design
>> Beginning Convergence Loop $OLVER02 Method: SECANT
Block: MEL-IN Model: HEATER
More

FIG. 13 – Un formulaire de résultats : les débits matériels


pour naviguer dans les
résultats
on peut choisir ici le
nom d'un débit dont on
veut consulter les résultats
File Edit View Data Tools Run Plot Library Window Help
Streams
Results
Streams
Blocks
Convergence
Flowsheeting Options
Results Summary
Run Status
Streams
Convergence
Material Heat Load Work Vol.% Curves Wt. % Curves Petro Curves Poly Curves
Display: All streams Format: GEN_M Stream Table
ALCOL ALREAC BZ-IN BZP H2-IN LEGERS
Temperature K 322,0 422,0 310,0 314,2 310,0 266,8
Pressure N/sqm 2,19875E+6 2,22915E+6 101325,000 2,33048E+6 2,33048E+6 1,36789E+6
Vapor Frac 0,000 1,000 0,000 0,000 1,000 1,000
Mole Flow mol/sec 14,410 73,899 13,889 13,889 43,068 0,541
Mass Flow kg/sec 1,176 1,848 1,085 1,085 0,104 0,009
Volume Flow cum/sec 0,002 0,115 0,001 0,001 0,048 0,001
Enthalpy MMkcal/hr -1,842 0,346 0,607 0,615 -0,042 -0,029
Mass Frac
H2 79 PPM 0,050 0,810 0,010
N2 0,001 0,031 0,058 0,189

4.2.3 Les séparateurs formels

Les modèles SEP et SEP2 ne sont pas associés à des opérations unitaires réelles, mais ils permettent de séparer un débit d'entrée en plusieurs débits de composition différente. On spécifie pour chaque débit la température et la pression, et, pour chaque constituant, le taux de récupération dans les débits de sortie (sauf un). Ces modèles peuvent être utilisés en cours de développement pour remplacer temporairement des opérations de séparations réelles qu'on ne souhaite pas modéliser complètement.

4.3 Flashes et échangeurs

4.3.1 Les flashes

Un flash est un équilibre entre phases fluides. Il en existe deux modèles : FLASH2 pour les équilibres liquide-vapeur, et FLASH3 pour les équilibres liquide-liquide-vapeur. Conformément à la règle de la variance pour un mélange de composition globale déterminée, il suffit de spécifier deux grandeurs, parmi pression, température, fraction vaporisée ou énergie reçue (DUTY). Pour FLASH3, on peut aussi indiquer comment distinguer les deux phases liquides en spécifiant pour la deuxième un constituant clé : la phase la plus riche en ce constituant sera le liquide 2.

4.3.2 Le HEATER

Un HEATER peut représenter n'importe quelle opération qui échange de la chaleur avec l'extérieur. Il peut y avoir un nombre quelconque de débits d'alimentation, mais une seule sortie (à la différence des flashes). Les spécifications sont les mêmes que pour un flash. Le modèle HEATER se contente de calculer les bilans matière et énergie, indépendamment de la façon dont l'énergie est échangée avec l'extérieur. (dans le schéma de production de cyclohexane, par exemple, le bloc MEL-IN est un HEATER, spécifié par une température et une pression de sortie, qui calculs simplement l'énergie à fournir. Physiquement, cela peut être une chaudière ou un échangeur de chaleur).

4.3.3 Les échangeurs de chaleur

HEATX et MHEATX sont des modèles de calcul d'échangurs ou de réseaux d'échangeurs de chaleur. Par rapport au HEATER, ils permettent de tenir compte des surfaces et coefficients d'échange thermique.

Il est souvent avantageux de modéliser un échangeur de chaleur entre deux débits du procédé par deux HEATERs couplés par un débit de chaleur (cf 8.1). Le dimensionnement peut ensuite être fait par le programme d'estimation des coûts.

4.4 Les colonnes

Il existe un grand nombre de modèles de calcul de distillation. Nous en utiliserons essentiellement deux : DSTWU pour le design de colonnes simples, RADFRAC pour le calcul rigoureux des colonnes.

4.4.1 DSTWU

Il s'agit d'un modèle de calcul approché de colonne simple (une charge unique, pas de soutirage latéral), basé en particulier sur les équations de Gilliland et Underwood. Le modèle est capable de calculer le taux de reflux minimal, et de trouver, pour des performances de séparation imposées entre deux constituants clés, le nombre d'étages correspondant à un taux de reflux donné, ou le taux de reflux correspondant à un nombre d'étages. On spécifie donc :

- les performances de séparation : on définit une clé lourde et une clé légère parmi les constituants (ce sont les composants entre lesquels la colonne doit "couper"), et, pour chacun des constituants clés, leur taux de récupération *dans le distillat* (en général, proche de 1 pour la clé légère, et de 0 pour la clé lourde)
- soit le nombre d'étages, soit le taux de reflux. Il est possible de spécifier le taux de reflux sous la forme d'un multiple du taux de reflux minimum, en indiquant une valeur négative : un taux de reflux de -1,3 sera interprété comme $1,3 \cdot r_{f,min}$.
- La pression en tête et en pied de colonne
- par défaut, le condenseur est supposé total. Un condenseur partiel peut être modélisé en indiquant une valeur non nulle pour RDV (taux de vapeur dans le distillat).

4.4.2 RADFRAC

C'est probablement le modèle le plus riche en possibilités du logiciel. RADFRAC permet de modéliser de façon rigoureuse des colonnes de distillation, d'absorption, d'entraînement à la vapeur, de tenir compte de démixions liquides ou de réactions chimiques sur les plateaux, de faire des calculs de dimensionnement, etc... Ce qu'il faut toujours spécifier :

- dans l'onglet Radfrac/Configuration, le nombre d'étages et deux spécifications supplémentaires entre taux de reflux, débit de distillat ou de résidu,

puissance termique au bouilleur ou au condenseur. Cela correspond aux 3 degrés de liberté de la distillation.
- dans l'onglet Radfrac/Streams, la position des alimentations et des soutirages (les étages sont comptés à partir du condensur)
- dans l'onglet Pressure, le profil de pression dans la colonne. On peut n'indiquer que la pression au condenseur si la colonne est supposée isobare ou indiquer la pression à quelques plateaux (avec interpolation et extrapolation linéaire).

RADFRAC est un modèle de simulation, mais on peut aussi imposer des spécifications de séparation en autorisant l'un des paramètres fixés dans les formulaires précédents à varier dans une certaine plage. La figure 14 montre comment, dans le procédé cyclohexane, on détermine le débit de résidu qui assure un taux de récupération de cyclohexane de 99,99% dans le résidu. On peut imposer autant de spécifications que l'on veut, à condition de libérer un nombre égal de variables. Il est bien plus efficace d'imposer ces spécifications à l'intérieur du calcul de la colonne, que de construire des spécifications de design (DESIGN-SPEC) externes.

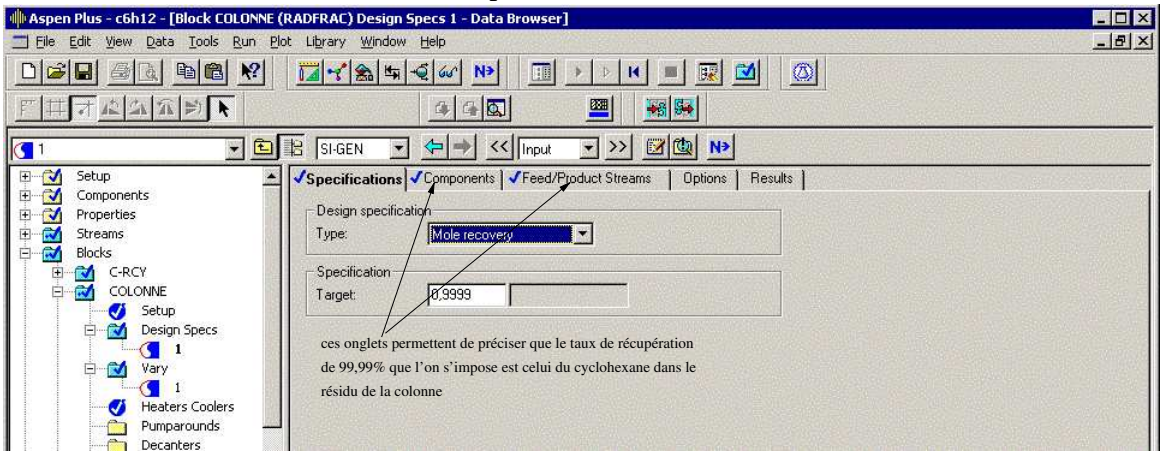
4.5 Les réacteurs

Les modèles de réacteurs les plus importants sont :
- le réacteur stoechimétrique (RSTOIC) : c'est un modèle très élémentaire, à qui on indique les réactions qui ont lieu (c'est à l'utilisateur de les équilibrer !) et un taux de conversion pour chacune de ces réactions
- le réacteur à l'équilibre. Le modèle le plus élaboré est RGIBBS, qui minimise l'enthalpie libre du mélange par rapport à la composition du mélange (sous contrainte de respecter les bilans en atomes) au nombre de phases et à leur composition. Les propriétés d'état standard de chaque molécule pouvant sortir du réacteur (par défaut, toutes les molécules définies dans la simulation) sont utilisées, ce qui évite de devoir introduire les réactions et leur constante d'équilibre
- les modèles de réacteurs basés sur la cinétique : RCSTR (réacteur parfaitement agité), RPLUG (réacteur piston) et RBATCH (réacteur fermé ou semi fermé).

4.6 Pompes et compresseurs

Pour une pompe, on spécifie soit la pression de sortie, soit la puissance. Pour un compresseur, on indique en plus le mode de calcul (isentropique, polytropique). On peut aussi fournir le rendement (isentropique ou polytropique).

FIG. 14 – Spécifications dans Radfrac



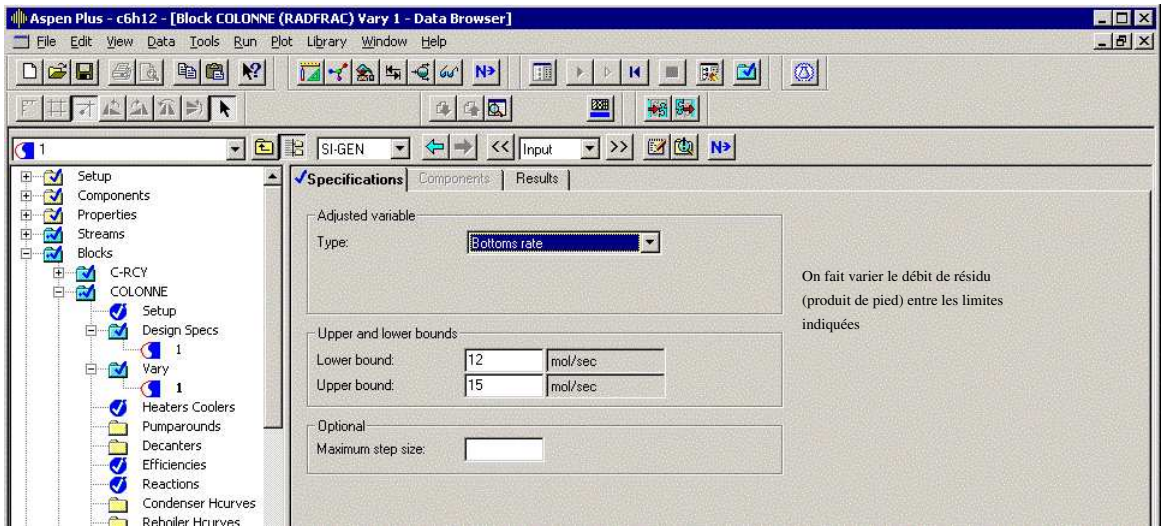
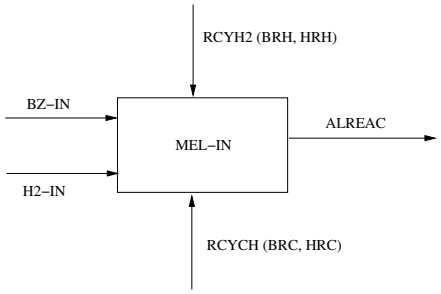


FIG. 15 – Mélangeur et débits



5 Les modes de calcul

Une *simulation* du procédé est possible dès que tous les degrés de liberté des opérations unitaires et des débits d'entrée sont renseignés. Mais on souhaite souvent imposer des conditions supplémentaires.

5.1 Spécification de design

Nous avons vu dans le procédé cyclohexane l'exemple de la spécification de design sur le rapport molaire H_2/C_6H_6 à l'entrée du réacteur. Imposer une spécification de design (poser une équation) demande de libérer un variable du procédé (inconnue) qui va être déterminée par résolution itérative de l'équation. La variable inconnue étant ici le débit total de H2-IN, l'ensemble des opérations qui séparent ce débit de celui sur lequel est imposée la condition (ici, le bloc MEL-IN) sera recalculé avec différentes hypothèses sur la valeur du débit H2-IN jusqu'à convergence. La façon d'introduire une spécification de design a été détaillée plus haut, nous n'y reviendrons donc pas.

5.2 Les blocs "Calculator"

Si l'on regarde de près la spécification de design décrite ci-dessus, on se rend compte qu'en fait la valeur du débit H2-IN peut être calculée analytiquement dès que l'on connaît les débits BZ-IN, RCYH2, RCYCH, qui se mélangent avec H2-IN pour donner ALREAC. Soient en effet (figure 15) :

- BRH, le débit partiel de benzène dans RCYH2
- BRC, le débit partiel de benzène dans RCYCH
- BIN, le débit partiel de benzène dans BZ-IN
- HRH, le débit partiel d'hydrogène dans RCYH2
- HRC, le débit partiel d'hydrogène dans RCYCH
- XH2IN, la fraction molaire d'hydrogène dans H2-IN

On peut calculer le débit de benzène arrivant au mélangeur :

BZTOT= BRH+BRC+BIN

On en déduit le débit d'hydrogène requis dans ALREAC, soit HAL :

HAL = 3.3 * BZTOT

Or, le débit d'hydrogéne recyclé, HRECY, est :

HRECY = HRH + HRC

et il faut donc un apport net d'hydrogène H2IN :

H2IN = HAL - HRECY

Le débit total de H2-IN, DH2IN s'en déduit alors par :

DH2IN = H2IN/XH2IN

Plutôt que de faire faire un calcul itératif par une spécification de design, il est possible d'imposer directement ces relations sous la forme d'instructions de calcul qui seront exécutées systématiquement avant le calcul de MEL-IN.

la figure 16 montre les étapes de la construction d'un bloc Fortran ("**Data / Flowsheeting Options / Calculator**") :

- définir les variables (les associer à des grandeurs du procédé)
- écrire les relations dans une syntaxe Fortran (des connaissances minimales en Fortran sont suffisantes)
- fournir les indications permettant de savoir quand exécuter le bloc Calculator. La méthode conseillée est de distinguer entre les variables "lues" par les instructions Fortran et les variables "écrites" par le bloc. On peut aussi demander que l'exécution se fasse avant ou après un calcul d'opération unitaire.

On notera qu'il faut aussi supprimer (ou cacher) la design-spec écrite précedemment pour éviter toute redondance.

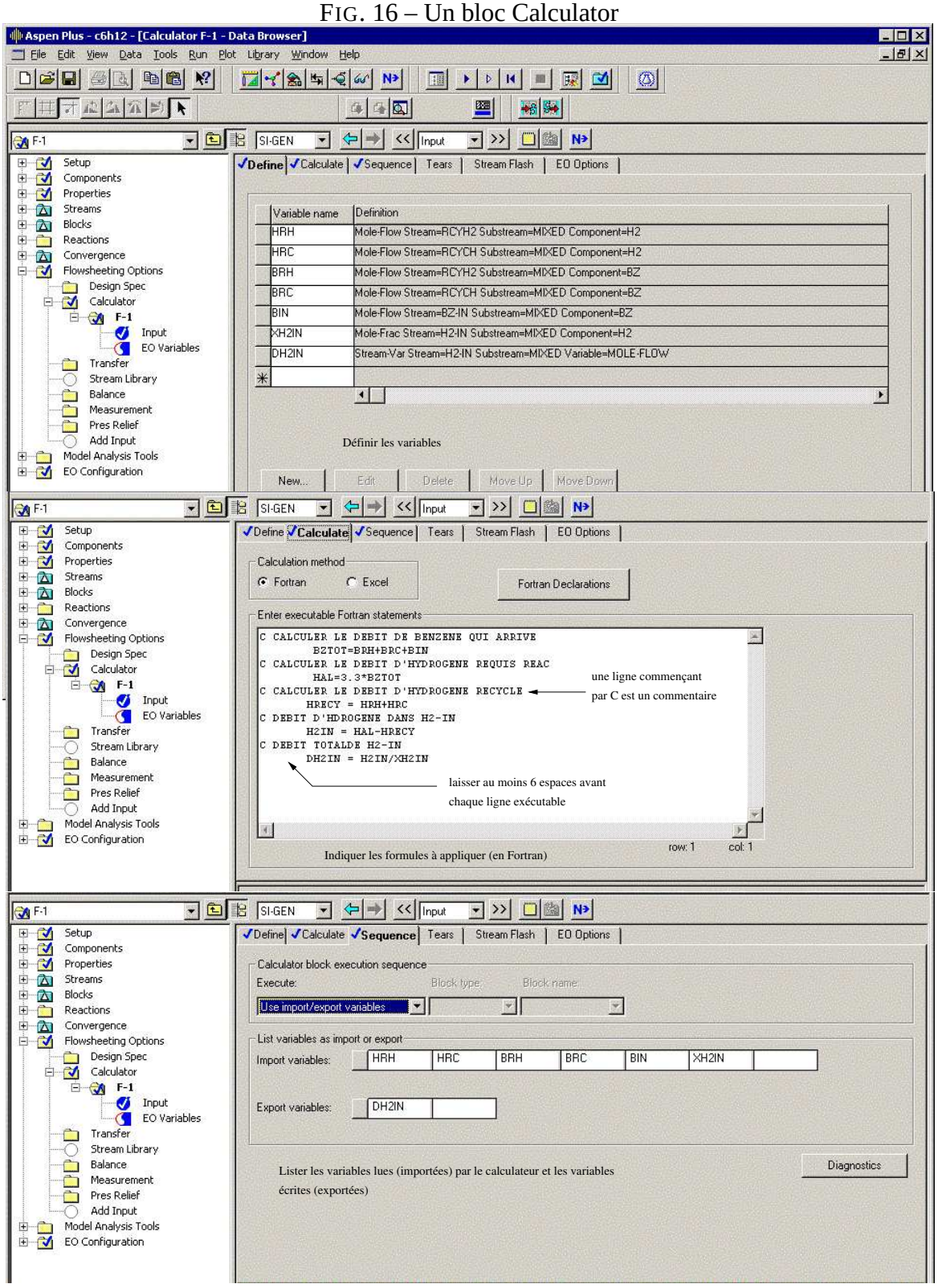
Les blocs Calculator sont la plupart du temps d'une écriture aisée dès lors qu'une bonne analyse du procédé a été faite, et ils facilitent considérablement l'utilisation du logiciel.

6 L'optimisation

L'optimiseur d'Aspen converge simultanément le problème de maximisation ou de minimisation de la fonction objectif, les spécifications de design et les recyclages.

Avant de passer à une optimisation, il convient de remplacer les spécifications de design existantes par des contraintes ("**Data / Model Analysis Tools / Constraints**"). Les formulaires "constraint" permettent d'écrire des conditions à respecter (sous forme d'égalités ou d'inégalités). A la différence des spécifications de design, il n'y a pas de variable associée à une contrainte : ces variables seront manipulées par l'optimiseur.

FIG. 16 – Un bloc Calculator


Aspen Plus - c6h12 - [Calculator F-1 - Data Browser]
File Edit View Data Tools Run Plot Library Window Help
Define Calculate Sequence Tears Stream Flash EO Options
Variable name | Definition
HRH | Mole-Flow Stream=RCYH2 Substream=MIXED Component=H2
HRC | Mole-Flow Stream=RCYCH Substream=MIXED Component=H2
BRH | Mole-Flow Stream=RCYH2 Substream=MIXED Component=BZ
BRC | Mole-Flow Stream=RCYCH Substream=MIXED Component=BZ
BIN | Mole-Flow Stream=BZ-IN Substream=MIXED Component=BZ
XH2IN | Mole-Frac Stream=H2-IN Substream=MIXED Component=H2
DH2IN | Stream-Var Stream=H2-IN Substream=MIXED Variable=MOLE-FLOW
Définir les variables
New... Edit Delete Move Up Move Down
Calculation method
Fortran Excel
Fortran Declarations
Enter executable Fortran statements
C CALCULER LE DEBIT DE BENZENE QUI ARRIVE
BZTOT=BRH+BRC+BIN
C CALCULER LE DEBIT D'HYDROGENE REQUIS REAC
HAL=3.3*BZTOT
C CALCULER LE DEBIT D'HYDROGENE RECYCLE
HRECY = HRH+HRC
C DEBIT D'HDROGENE DANS H2-IN
H2IN = HAL-HRECY
C DEBIT TOTALDE H2-IN
DH2IN = H2IN/XH2IN
une ligne commençant par C est un commentaire
laisser au moins 6 espaces avant chaque ligne exécutable
row: 1 col: 1
Indiquer les formules à appliquer (en Fortran)
Calculator block execution sequence
Execute:
Use import/export variables
List variables as import or export
Import variables: HRH HRC BRH BRC BIN XH2IN
Export variables: DH2IN
Lister les variables lues (importées) par le calculateur et les variables écrites (exportées)
Diagnostics

Pour poser un problème d'optimisation, ("**Data / Model Analysis Tools / Optimization**") on commence par définir la fonction à maximiser/minimiser à partir de variables du procédé : on passe donc par un formulaire "define" pour associer des variables fortran à des grandeurs procédé.

On définit ensuite l'objectif : la fonction à maximiser ou minimiser (en termes des variables déclarées dans le formulaire "define") et les contraintes associées.

Il faut enfin indiquer les variables de décision, qui seront manipulées par l'optimiseur. A la différence de la spécification de design, une optimisation peut manipuler simultanément plusieurs variables.

7 Comment accéder aux grandeurs du procédé

Les blocs Calculator, les spécification de design, commme l'optimisation nécessitent d'associer des variables aux grandeurs du procédé, ou de définir les variables procédé à manipuler.

Dans les deux cas, on accède à un paramètre procédé de la même façon, en choisissant leur type et l'opération ou le débit auquel il se rapporte :

- si la grandeur est un débit partiel, son type est MOLE-FLOW ou MASS-FLOW. Il faut ensuite préciser le débit et le constituant concerné
- on accéde de la même façon à une fraction molaire (MOLE-FRAC) ou massique (MASS-FRAC) d'un constituant dans un débit
- si la grandeur est une variable globale associée à un débit (température, pression, débit total) son type est STREAM-VAR. Il faut ensuite indiquer le débit et la variable concernée (par exemple, TEMP, PRES, MOLE-FLOW)
- si la grandeur est associée à une opération, son type est BLOCK-VAR. Il faut ensuite préciser l'opération et la variable concernée.

Tous les mots-clés peuvent être choisis dans des listes défilantes (bouton droit), et l'explication de chaque choix est donnée dans la ligne d'aide contextuelle.

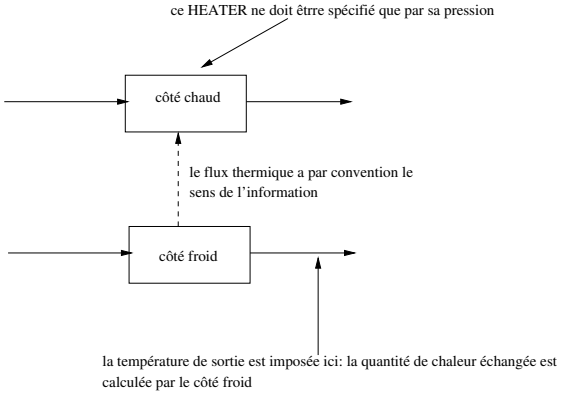
Attention : lorsque vous accédez à une variable du procédé, l'unité dans laquelle cette variable est renvoyée est l'unité par défaut du système d'unités actif dans la fenêtre DEFINE. Il est fortement conseillé d'utiliser le SI par défaut.

8 Quelques conseils

8.1 Les débits de chaleur

La plupart des modèles d'opération possèdent aussi des ports d'entrée-sortie pour des débits de chaleur (HEAT-STREAM). Ces débits peuvent être très utiles dans certains situations, comme la modélisation simple d'échangeurs de chaleur.

FIG. 17 – Utilisation d'un débit de chaleur


ce HEATER ne doit êtrre spécifié que par sa pression
côté chaud
le flux thermique a par convention le sens de l'information
côté froid
la température de sortie est imposée ici: la quantité de chaleur échangée est calculée par le côté froid

Un échangeur de chaleur peut être vu comme deux blocks HEATER, correspondant à chacun des deux côtés (calandre et tubes pour un échangeur tubulaire), couplés thermiquement (la chaleur cédée par le côté chaud est exactement celle reçue par le côté froid). On ne peut donc s'imposer que l'une des températures de sortie, par exemple du côté froid.

On peut donc modéliser un échangeur comme deux HEATERs reliés par un débit de chaleur. Le sens de ce débit est celui de l'information : si la quantité de chaleur est calculée par le HEATER correspondant au côté froid de l'échangeur, on dirigera le flux de chaleur du côté froid vers le côté chaud (il aura donc une valeur négative) (figure 17).

Cete façon de représenter les échangeurs évite souvent de faire apparaître une boucle de recyclage supplémentaire dans les calculs, et simplifie donc la convergence. Par rapport à une modélisation complète sous la forme d'un échangeur de chaleur (modèle HEATX), on perd toute information sur le dimensionnement (surface d'échange), mais ces calculs peuvent être faits lors de l'évaluation économique du procédé.

8.2 Courbes thermodynamiques

Un certain nombre de propriétés de corps purs (PL= pression de saturation, DHVL=enthalpie de vaporisation, etc...) peuvent être tabulées et tracées en fonction de la température ("**Tools / Analysis / Property /Pure**").

On peut aussi obtenir les lentilles d'équilibre binaires (isothermes ou isobares) dans le menu ("**Tools/ Analysis / Property / Binary**").

8.3 Convergence

Il est souvent utile d'aider à la convergence des recyclages lorsque l'on dispose d'une bonne initialisation d'un débit interne à la boucle. Il suffit de spécifier ce débit comme débit coupé ("**Data / Convergence / Tear**"). Pour initialiser le débit, le sélectionner, puis choisir Input dans le menu contextuel (cf 3.2.4). Si l'utilisateur ne spécifie pas assez de courants coupés pour ouvrir au moins chaque boucle une fois, le logiciel complétera automatiquement la liste des courants coupés.

Si le processus de convergence d'un recyclage s'arrête parce que le nombre maximum d'itérations est atteint, il est possible d'augmenter le nombre d'itérations autorisées. Pour ce faire, aller dans "**Data/Convergence/Conv-options**". Dans le "browser" de droite, choisir d'abord Defaults, onglet "Default methods" et vérifier quelle est la méthode numérique utilisée pour converger les courants coupés (Tears), normalement la méthode de Wegstein. Puis choisir la rubrique Methods dans le browser, choisir l'onglet correspondant à la méthode numérique concernée, et fixer le nombre maximal d'itérations.

8.4 Réinitialisation

D'une exécution à l'autre, les calculs sont normalement réinitialisés sur le résultat de la simulation précédente. Si des paramètres importants ont été changés par l'utilisateur, il est possible que cette initialisation ne convienne plus, et emmène le logiciel très loin de la convergence attendue. Dans ce cas, il est conseillé de réinitialiser "à zéro" tous les calculs ("**Run / Reinitialize**").

8.5 Analyse de sensibilité

Il peut être utile de faire une analyse de sensibilité sur un procédé : on pourrait, par exemple, dans le procédé cyclohexane, souhaiter savoir comment varie la composition en impuretés (azote et méthane) de la charge du réacteur en fonction du taux de purge vapeur. On demande une analyse de sensibilité dans "**Data / Model Analysis Tools / Sensitivity**" : on définit les grandeurs à calculer (Onglet "define"), les variables et les valeurs à leur donner, enfin les tableaux à construire. L'approche est très similaire à la spécification de design.

8.6 Les courbes

De nombreux formulaires de résultats permettent de tracer des courbes en choisissant une colonne de données pour l'axe des x et plusieurs autres colonnes pour l'axe de y. Voir le menu "Plot" du formulaire.

8.7 Fichier de résultats complets

Il est souvent utile de disposer d'un fichier de résultats complets, que l'on peut imprimer pour l'analyser en détail. POur ce faire : "**File / Export**", sélectionner "report" et donner un nom. Un fichier ASCII portant ce nom avec l'extension .rep sera créé.

8.8 Sauvegardes

La construction d'un modèle est un travail souvent long et ardu... et il arrive que le logiciel plante ! Le plus souvent, il sera possible de recharger l'état antérieur, mais ce n'est pas systématique. Des sauvegardes régulières permettront de minimiser les risques.